Métodos Numéricos

Departamento de Matemática Aplicada II
Escuela Técnica Superior de Ingeniería
Universidad de Sevilla

Lección 4: Cuadratura y derivación numéricas

Índice

La mayoría de las integrales que aparecen en la práctica no pueden ser calculadas explícitamente. De hecho, solo ocasionalmente es posible obtener una primitiva de la función a integrar.

Los métodos numéricos para calcular integrales se basan en las denominadas reglas de cuadratura[1], esto es, fórmulas del tipo

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx (b-a)(\omega_1 f(x_1) + \omega_2 f(x_2) + \cdots + \omega_n f(x_n)),$$

donde $\omega_1, \omega_2, \ldots, \omega_n$ son números reales y $x_1 < x_2 < \cdots < x_n$ son puntos del intervalo $[a, b]$.

1. Reglas de cuadratura numérica

1.1. Interpolación y cuadratura. Reglas elementales cerradas

Consideremos una función integrable $f : [a, b] \to \mathbb{R}$ y seleccionemos en el intervalo $[a, b]$ una colección de n puntos equiespaciados, denominados nodos de la cuadratura, $x_1 < x_2 < \cdots < x_n$, de modo que $x_1 = a$ y $x_n = b$. Asimismo, denotemos por p el polinomio de interpolación determinado por f y esos nodos. En su forma de Lagrange,

$$p(x) = f(x_1)L_1(x) + f(x_2)L_2(x) + \cdots + f(x_n)L_n(x),$$

donde los L_j son los correspondientes polinomios de Lagrange. La regla de cuadratura elemental cerrada[2] de n nodos surge al aproximar

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \int_a^b p(x)\,dx = \sum_{j=1}^{n} f(x_j) \int_a^b L_j(x)\,dx.$$

Si introducimos los coeficientes, denominados pesos de la cuadratura,

$$\omega_j := \frac{1}{b-a} \int_a^b L_j(x)\,dx, \quad j = 1, 2, \ldots, n,$$

la regla de cuadratura elemental cerrada se expresa como

$$\begin{aligned}\int_a^b f(x)\,dx \approx Q(f) &:= (b-a) \sum_{j=1}^{n} \omega_j f(x_j) \\ &= (b-a)\left(\omega_1 f(x_1) + \omega_2 f(x_2) + \cdots + \omega_n f(x_n)\right).\end{aligned}$$

Observemos que los números ω_j no dependen de la función f. Más aún, puede comprobarse que estos números tampoco dependen del intervalo $[a, b]$. Es frecuente, por tanto, definir las reglas de cuadratura únicamente en ciertos intervalos de «referencia», tales como $[0, 1]$ o $[-1, 1]$.

[1] Los matemáticos de la Grecia clásica, según la doctrina pitagórica, entendían el cálculo de un área como el proceso de construcción geométrica de un cuadrado de igual área. A este proceso se le dio el nombre de «cuadratura». Dada la asociación entre las integrales definidas y las áreas de regiones planas, la estimación de integrales definidas se conoce en el contexto del análisis numérico como cuadratura, reservándose la palabra «integración» para la resolución de ecuaciones diferenciales.

[2] La regla de cuadratura se dice «elemental» debido a la distribución uniforme de los nodos en el intervalo de integración y se dice «cerrada» al elegir $x_1 = a$ y $x_n = b$.

Muchas reglas de cuadratura elementales tienen nombre propio que conviene conocer. Así, nos encontramos, por ejemplo, con la regla del punto medio[3], la regla del trapecio, la regla de Simpson 1/3[4], la regla de Simpson 3/8, etc. Además, sus pesos de cuadratura asociados ω_j están perfectamente tabulados:

Nombre de la regla	Nodos de cuadratura	Pesos de cuadratura	Regla de cuadratura
Regla del punto medio	$\frac{a+b}{2}$	1	$(b-a)f(\frac{a+b}{2})$
Regla del trapecio	$a<b$	$\frac{1}{2}\quad\frac{1}{2}$	$\frac{b-a}{2}(f(a)+f(b))$
Regla de Simpson 1/3	$a<\frac{a+b}{2}<b$	$\frac{1}{6}\quad\frac{4}{6}\quad\frac{1}{6}$	$\frac{b-a}{6}\big(f(a)+4f(\frac{a+b}{2})+f(b)\big)$
Regla de Simpson 3/8	$a<\frac{2a+b}{3}<\frac{a+2b}{3}<b$	$\frac{1}{8}\quad\frac{3}{8}\quad\frac{3}{8}\quad\frac{1}{8}$	$\frac{b-a}{8}\big(f(a)+3f\big(\frac{2a+b}{3}\big)+3f\big(\frac{a+2b}{3}\big)+f(b)\big)$

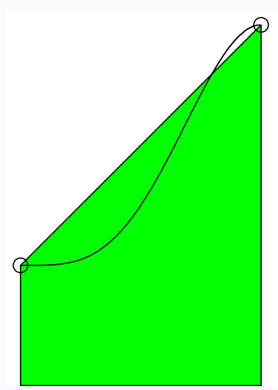
(1)

Ejemplo 1.1 ▶ Regla del trapecio

El nombre «regla del trapecio» surge al observar que dicha regla aproxima la integral de f en el intervalo $[a,b]$ (donde $f(x)\geqslant 0$ para $x\in[a,b]$) mediante el área del trapecio delimitado por el eje OX y los puntos $f(a)$ y $f(b)$, cuyo valor es

$$\frac{b-a}{2}\left(f(a)+f(b)\right).$$

Gráficamente,



Proyecto 1.1 (solución en página 14)

Considera la regla de Simpson 3/8, dada por (mira la tabla (1))

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \frac{b-a}{8}\left(f(a)+3f\left(\frac{2a+b}{3}\right)+3f\left(\frac{a+2b}{3}\right)+f(b)\right).$$

Comprueba numéricamente que sus pesos de cuadratura no dependen del intervalo de integración. Para ello, genera aleatoriamente 10 intervalos de integración y calcula los pesos para cada uno de ellos. Observarás que se obtienen siempre los mismos valores.

[3] La regla del punto medio no es una regla cerrada, al estar basada en un único nodo de cuadratura (véase la tabla (1)). Se trata de un ejemplo de regla de cuadratura elemental «abierta».

[4] O, simplemente, regla de Simpson.

1.2. Grado de precisión

Consideremos, de nuevo, la regla de cuadratura

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx Q(f) = (b-a)\sum_{j=1}^{n} \omega_j f(x_j).$$

Se denomina grado de precisión de Q al único número entero $r \geqslant 0$ verificando que

$$\int_a^b p(x)\,dx = Q(p),$$

para todos los polinomios p de grado menor o igual que r, y tal que existe un polinomio q de grado $r+1$ para el que

$$\int_a^b q(x)\,dx \neq Q(q).$$

La importancia del grado de precisión radica en que, para funciones f suficientemente regulares, es posible establecer una fórmula del error que depende fuertemente de dicho valor. Por ejemplo, para las reglas elementales cerradas Q, se tiene que

$$\left| \int_a^b f(x)\,dx - Q(f) \right| \leqslant C(b-a)^{r+2},$$

donde $C = C(f)$ depende de la regularidad de f. La desigualdad anterior muestra claramente que el número r desempeña un papel crucial en la estimación del error cometido. De hecho, si $|b-a| < 1$, el factor

$$(b-a)^{r+2}$$

disminuye a medida que r crece.

En resumen, para una cantidad fija de nodos a evaluar, las reglas de cuadratura con grado de precisión más alto suelen proporcionar mejores aproximaciones a una integral dada. Por ello, el grado de precisión se considera un buen parámetro para comparar la eficiencia de las distintas reglas de cuadratura.

Hemos visto al comenzar la lección que las reglas elementales cerradas surgen al aproximar

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \int_a^b p_{[f,n]}(x)\,dx,$$

donde $p_{[f,n]}$ denota el polinomio de interpolación basado en f y en cierto número $n \geqslant 2$ de nodos equiespaciados en $[a,b]$. En particular, $p_{[f,n]}$ es un polinomio de grado menor o igual que $n-1$.

Es fácil comprobar que si q es un polinomio de grado menor o igual que $n-1$ entonces $q \equiv p_{[q,n]}$, es decir, el polinomio de interpolación que interpola un polinomio q de grado menor o igual que $n-1$ en n puntos es el propio polinomio q. Por tanto, toda regla de cuadratura basada en n nodos tiene grado de precisión mayor o igual que $n-1$. De hecho, para las reglas elementales cerradas, puede probarse que el grado de precisión es

i) n, si n es impar;

ii) $n-1$, si n es par.

En particular, esto explica que la regla de Simpson tenga grado de precisión tres.

Ejemplo 1.2 ▶ Grado de precisión

Consideremos la regla de Simpson, dada por (mira la tabla (1))

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx S(f) := \tfrac{b-a}{6}\left(f(a) + 4f(\tfrac{a+b}{2}) + f(b)\right).$$

Vamos a verificar que el grado de precisión de esta regla es tres. Puesto que la regla de Simpson está basada en $n = 3$ nodos, su grado de precisión es, al menos, $n - 1 = 2$. Pero,

$$\int_a^b x^3\,dx = \tfrac{b^4-a^4}{4},$$

que coincide con el valor obtenido aplicando la regla de Simpson. En efecto,

$$S(x^3) = \tfrac{b-a}{6}\left(a^3 + 4\left(\tfrac{a+b}{2}\right)^3 + b^3\right) = \tfrac{b-a}{4}\left(a^3 + a^2b + ab^2 + b^3\right) = \tfrac{b^4-a^4}{4}.$$

Dado, por tanto, un polinomio cualquiera de tercer grado $p_3(x) = a_3x^3 + a_2x^2 + a_1x + a_0$ se tiene que

$$\int_a^b p_3(x)\,dx = a_3 \underbrace{\int_a^b x^3\,dx + \int_a^b (a_2x^2 + a_1x + a_0)\,dx}_{\substack{\text{La regla de Simpson proporciona el} \\ \text{valor exacto de ambas integrales}}} = S(p_3).$$

Así, el grado de precisión de la regla es, al menos, tres. Sin embargo,

$$\int_0^1 x^4\,dx = \tfrac{1}{5},$$

que no coincide con el resultado de aplicar la regla de Simpson, cuyo valor es

$$S(x^4) = \tfrac{1}{6}\left(4\tfrac{1}{2^4} + 1\right) = \tfrac{5}{24}.$$

Así, el grado de precisión de la regla de Simpson es exactamente tres.

Como puede intuirse, la elección/posición de los nodos afecta al grado de precisión de las correspondientes reglas de cuadratura. Por tanto, fijado un número n de nodos, cabe preguntarse si es posible elegir dichos nodos (y los pesos) de modo que generen reglas de cuadratura con grado de precisión lo más alto posible. Estas cuestiones conducen de modo natural a la cuadratura gaussiana.

Ejemplo 1.3 ▶ Cuadratura gaussiana

La regla de cuadratura de Gauss-Legendre con dos nodos de cuadratura está definida como

$$\int_{-1}^1 f(x)\,dx \approx 2\left(\omega_1 f(x_1) + \omega_2 f(x_2)\right),$$

donde los nodos de cuadratura, x_1 y x_2, son las raíces del polinomio de Legendre de segundo grado, $p_2(x) = \frac{1}{2}\left(3x^2 - 1\right)$, es decir, $x_1 = -\frac{1}{\sqrt{3}}$ y $x_2 = \frac{1}{\sqrt{3}}$.

La regla de cuadratura de Gauss-Legendre con tres nodos de cuadratura está definida como
$$\int_{-1}^{1} f(x)\,dx \approx 2\left(\omega_1 f(x_1) + \omega_2 f(x_2) + \omega_3 f(x_3)\right),$$
donde los nodos de cuadratura, x_1, x_2 y x_3, son las raíces del polinomio de Legendre de tercer grado, $p_3(x) = \frac{1}{2}\left(5x^3 - 3x\right)$, es decir, $x_1 = -\sqrt{\frac{3}{5}}$, $x_2 = 0$ y $x_3 = \sqrt{\frac{3}{5}}$.

En el problema 1.1 se calculan los valores de los pesos de cuadratura de ambas reglas. Una vez obtenidos estos pesos, se puede comprobar que las expresiones finales de las reglas de Gauss-Legendre de dos y tres nodos son, respectivamente,

$$\int_{-1}^{1} f(x)\,dx \approx f\left(-\tfrac{1}{\sqrt{3}}\right) + f\left(\tfrac{1}{\sqrt{3}}\right),$$
$$\int_{-1}^{1} f(x)\,dx \approx \tfrac{5}{9} f\left(-\sqrt{\tfrac{3}{5}}\right) + \tfrac{8}{9} f(0) + \tfrac{5}{9} f\left(\sqrt{\tfrac{3}{5}}\right).$$

Problema 1.1

Considera las reglas de cuadratura de Gauss-Legendre dadas en el ejemplo 1.3. Determina los valores de los pesos de cuadratura de ambas reglas y sus respectivos grados de precisión.

Sea la integral
$$\int_0^1 e^x\,dx.$$
Aproxímala mediante las dos reglas de cuadratura de Gauss-Legendre mencionadas. Aproxímala también mediante las reglas de cuadratura del punto medio, del trapecio y de Simpson. Calcula los diferentes errores cometidos y compara el nivel de eficiencia de las distintas reglas.

El planteamiento general de la cuadratura gaussiana considera reglas de cuadratura del tipo
$$\int_a^b f(x)W(x)dx \approx Q_W(f) = \sum_{j=0}^{n} \omega_j f(x_j),$$
donde W es cierta función positiva y continua en (a, b), llamada función peso. Conviene observar que la fórmula de cuadratura Q_W estima la integral evaluando únicamente f, es decir, no evalúa la función peso W. El concepto de grado de precisión se extiende de modo directo y natural a este contexto y, nuevamente, es un indicador de la bondad de la regla de cuadratura.

Fijada la función peso W y el número n de nodos y pesos de cuadratura, los dos hechos fundamentales de la cuadratura gaussiana son los siguientes: *i*) todas las posibles elecciones de nodos y pesos conducen a reglas de cuadratura con grado de precisión menor o igual que $2n - 1$; *ii*) existe una única colección de n nodos y n pesos de modo que la regla asociada tiene exactamente grado de precisión $2n - 1$ y esta elección específica es la que se denomina regla de cuadratura gaussiana asociada al par (W, n).

Como cabe esperar, las reglas de Gauss-Legendre de dos y tres nodos mostradas previamente son un caso particular de cuadratura gaussiana y están asociadas al peso $W(x) = 1$, $x \in (-1, 1)$.

1.3. Cuadratura compuesta

Las estimaciones del error asociado a reglas de cuadratura cerradas, vistas en la sección anterior, muestran que para obtener aproximaciones precisas de una integral dada, necesariamente hay que dividir el intervalo de integración en subintervalos suficientemente pequeños. Esto es cierto en general y, por ello, la estrategia razonable para estimar

$$\int_a^b f(x)\,dx$$

es dividir el intervalo $[a, b]$ en m subintervalos mediante una partición

$$\Delta \;\equiv\; a = x_1 < x_2 < \cdots < x_{m+1} = b,$$

elegir una regla de cuadratura Q_j en cada subintervalo $[x_j, x_{j+1}]$, $j = 1, 2, \ldots, m$, aplicarla a la restricción f_j de f a dicho subintervalo y, finalmente, aprovechando la aditividad de la integral sobre el dominio de integración, realizar la aproximación

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx Q_1(f_1) + Q_2(f_2) + \cdots + Q_m(f_m).$$

Las reglas $Q_1, Q_2, \ldots, Q_m$ suelen ser, esencialmente, la «misma» regla aplicada en distintos intervalos. A este respecto, observemos que si una regla de cuadratura se define, por ejemplo, en el intervalo $[0, 1]$, dicha regla se extiende automáticamente a un intervalo arbitrario $[a, b]$ mediante el cambio de variable $x = a + (b - a)s$.

Cuando el proceso anterior se aplica a una regla «matriz» Q en cierto intervalo (junto con sus extensiones), la estimación final resultante se denomina regla de cuadratura compuesta basada en Q y en la partición Δ.[5].

Respecto al error cometido, es posible probar que si f es suficientemente regular, dicho error tiende a cero cuando h tiende a cero, siendo h el diámetro de la partición, es decir,

$$h := \max_{1 \leqslant j \leqslant m} (x_{j+1} - x_j).$$

Es más, la «velocidad» de convergencia a cero está fuertemente ligada al grado de precisión.

En el caso de una regla de cuadratura elemental, el error E_f cometido verifica

$$E_f \leq C \max_{x \in [a,b]} \left| f^{(r+1)}(x) \right| h^{r+1}, \tag{2}$$

siendo C una constante positiva y r el grado de precisión.

No solo el grado de precisión es importante; la regularidad de f desempeña también un papel relevante en la estimación de la integral. De hecho, la acotación del error (2) solamente es cierta si f es suficientemente derivable[6].

[5]Para distinguir la regla de cuadratura Q, sea elemental o gaussiana, de la regla de cuadratura compuesta basada en Q, es frecuente llamar a Q regla de cuadratura «simple». Así, se habla de la regla de Simpson simple, de la regla del trapecio simple, de la regla de Gauss-Legendre con dos nodos simple, etc.

[6]De clase $C^{r+1}[a, b]$, para ser precisos.

Proyecto 1.2 (solución en página 15)

Aplica la regla de Simpson compuesta (consulta el proyecto 1.3) al cálculo de la integral

$$\int_0^{15} x\cos(x)\,dx$$

y comprueba que su error verifica $E(h) = \mathcal{O}(h^4)$, tal como predice la teoría. Sin embargo, si realizas la misma operación con la integral

$$\int_0^{15} \sqrt{x}\,dx$$

observarás que solo se detecta una evolución del error de tipo $E(h) = \mathcal{O}(h^{1.5})$. Explica a qué se debe este fenómeno.

Ejemplo 1.4 ▶ Cuadratura compuesta

Vamos a aproximar la integral

$$\int_0^1 x^4\,dx = \tfrac{1}{5} = 0.2$$

de dos formas: primero con la regla de Simpson simple y después con la regla de Simpson compuesta para dos subintervalos (consulta el proyecto 1.3).

1. Aplicando la regla de Simpson simple, obtenemos

$$\int_0^1 x^4\,dx \approx \tfrac{5}{24} = 0.2083,$$

tal como vimos en el ejemplo 1.2.

2. La regla de Simpson compuesta para dos subintervalos, por ejemplo $\left[0, \frac{1}{2}\right]$ y $\left[\frac{1}{2}, 1\right]$, proporciona la aproximación

$$\begin{aligned}
\int_0^1 x^4\,dx &= \int_0^{\frac{1}{2}} x^4\,dx + \int_{\frac{1}{2}}^1 x^4\,dx \\
&\approx \tfrac{1}{12}\left(4\tfrac{1}{4^4} + \tfrac{1}{2^4}\right) + \tfrac{1}{12}\left(\tfrac{1}{2^4} + 4\tfrac{3^4}{4^4} + 1\right) \\
&= \tfrac{1}{12}\left(4\tfrac{1}{4^4} + \tfrac{2}{2^4} + 4\tfrac{3^4}{4^4} + 1\right) \\
&= \tfrac{77}{384} \\
&\approx 0.2005.
\end{aligned}$$

Como era de esperar, el valor que ofrece la regla compuesta es más preciso que el valor obtenido con la regla elemental[a].

[a] Es fácil comprobar que, aplicando la regla de Simpson compuesta para cuatro subintervalos uniformemente distribuidos en el intervalo de integración, la aproximación de la integral gana un dígito más de precisión. En concreto, su valor es, aproximadamente, 0.20003.

Ejercicio 1.1

Diseña una función de MATLAB® que implemente la regla del trapecio compuesta, basada en una partición uniforme del intervalo de integración. Los argumentos de entrada deben ser la función a integrar, los límites de integración y el número de subintervalos en los que se divide el intervalo de integración. El argumento de salida debe ser el valor estimado de la integral.

Utilizando la función diseñada, obtén seis cifras significativas correctas del valor de la integral

$$\int_{-1}^{1} x^2 e^{-x^2}\, dx.$$

Proyecto 1.3 (solución en página 18)

Queremos evaluar la integral

$$\int_a^b f(x)\, dx$$

utilizando la regla de Simpson compuesta para n subintervalos de igual longitud. Sean

$$h = \frac{b-a}{2n}$$

y

$$x_i = a + (i-1)h, \quad i = 1, 2, \ldots, 2n+1.$$

Si aplicamos la regla de Simpson elemental en uno cualquiera de los subintervalos, por ejemplo en $[x_{2i-1}, x_{2i+1}]$, donde $i \in \{1, 2, \ldots, n\}$, se tiene

$$\int_{x_{2i-1}}^{x_{2i+1}} f(x)\, dx \approx \frac{x_{2i+1} - x_{2i-1}}{6} \left(f(x_{2i-1}) + 4f(x_{2i}) + f(x_{2i+1}) \right).$$

Ahora bien, la regla de Simpson compuesta es, precisamente, la suma de todas esas integrales, esto es,

$$\begin{aligned} S(f,h) &:= \sum_{i=1}^{n} \frac{2h}{6} \left(f(x_{2i-1}) + 4f(x_{2i}) + f(x_{2i+1}) \right) \\ &= \frac{h}{3} \left(f(a) + 4\sum_{i=1}^{n} f(x_{2i}) + 2\sum_{i=1}^{n-1} f(x_{2i+1}) + f(b) \right). \end{aligned}$$

Construye una función de MATLAB® que implemente la regla de Simpson compuesta. Los argumentos de entrada deben ser la función a integrar, el intervalo de integración y el número total de aplicaciones de la regla de Simpson. El argumento de salida debe ser el valor estimado de la integral.

Utiliza esta función para calcular nueve cifras significativas correctas del valor de la integral

$$\int_0^1 \frac{dx}{\sqrt{1+x^4}}.$$

Problema 1.2

Considera las dos reglas de cuadratura gaussiana dadas en el ejemplo 1.3, cuyos pesos de cuadratura calculaste en el problema 1.1. Aproxima el valor de la integral

$$\int_0^{\frac{\pi}{3}} \operatorname{sen}(x)\, dx$$

mediante las correspondientes reglas compuestas de Gauss-Legendre de dos y tres nodos, respectivamente, tomando primero 10 subintervalos de igual longitud y después 100 subintervalos de igual longitud.

Repite los cálculos, pero utilizando ahora las reglas compuestas del punto medio, del trapecio y de Simpson. En todos los casos, calcula los errores cometidos y compara la eficiencia de las diferentes reglas compuestas.

1.4. Cuadratura adaptativa. La orden `integral`

La elección de puntos equiespaciados en la partición Δ asociada a la cuadratura compuesta basada en cierta regla de cuadratura Q, si bien es la opción más simple, en muchísimas ocasiones dista de ser la más eficiente. De hecho, no es raro encontrar integrales donde el integrando presenta grandes oscilaciones en ciertas regiones y, en cambio, es casi constante en otras zonas del dominio de integración. De modo natural, para obtener una buena aproximación de dicha integral con el menor número posible de evaluaciones del integrando, es evidente que conviene aplicar Q en subintervalos de longitud pequeña en el primer caso, pero podría aplicarse (sin pérdidas notables de precisión) en intervalos de longitud «grande» en el segundo caso.

La cuadratura adaptativa da forma a la observación anterior y plantea una cuidadosa y paulatina selección de los puntos donde se evalúa el integrando y, por tanto, de los subintervalos donde se aplica la regla de cuadratura Q. En concreto, cierto subintervalo se admite como válido para el proceso adaptativo (y, por tanto, no hace falta refinarlo) si la aproximación de la integral en dicho subintervalo con la regla Q pasa ciertos criterios relacionados con estimaciones del error cometido hasta ese momento. Cuando este error se refiere a otros subintervalos anteriores y cercanos, se habla de cuadratura adaptativa «local». Por el contrario, si se tienen en cuenta todos los subintervalos generados, se habla de cuadratura adaptativa «global». En particular, la partición Δ no se elige a priori, sino que se va determinando en función de las estimaciones del error que se van obteniendo paso a paso. En consecuencia, las evaluaciones del integrando se distribuyen por la zona de integración de acuerdo con la complejidad de dicha función.

La orden de MATLAB® `integral` implementa la cuadratura adaptativa global. Está basada en una regla de cuadratura gaussiana con un grado de precisión muy alto[7]. Es más, permite

[7] Para ser precisos, se trata de una variante de la cuadratura gaussiana conocida como regla de cuadratura de Gauss-Kronrod $(7, 15)$. Consiste, en esencia, en tomar $n = 7$ nodos procedentes de una regla de cuadratura gaussiana (denominados, en consecuencia, nodos de Gauss) e intercalar entre ellos $n+1 = 8$ nodos (llamados nodos de Kronrod) elegidos de modo tal que la regla de cuadratura resultante tenga grado de precisión $3n + 2 = 23$ (si n fuera par, el grado de precisión sería $3n + 1$). La regla de cuadratura de Gauss-Kronrod $(7, 15)$ está asociada al peso $W(x) = 1$, $x \in (-1, 1)$.

calcular directamente integrales impropias de primera especie[8] y de segunda especie[9].

Ejercicio 1.2

Utilizando la orden de MATLAB® `integral`, aproxima el valor de las siguientes integrales, cuyo valor exacto se proporciona, y calcula los errores cometidos.

$$i) \quad \int_0^1 \frac{x^4}{1+x^2}\,dx = \frac{\pi}{4} - \frac{2}{3},$$

$$ii) \quad \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\cos(x)}{(1+x^2)^2}\,dx = \frac{\pi}{e},$$

$$iii) \quad \int_0^1 t^{\frac{5}{3}}(1-t)^{-\frac{1}{3}}\,dt = \beta(\tfrac{8}{3}, \tfrac{2}{3}).$$

(Observa que la última integral tiene una singularidad en el extremo superior del intervalo de integración y es, por tanto, impropia de segunda especie).

Indaga en la ayuda de MATLAB® y averigua cómo podrías mejorar la precisión del cálculo de las integrales anteriores. Vuelve a calcularlas, pero esta vez con una tolerancia de 10^{-12}. ¿Qué observas?

Ejercicio 1.3

Considera el spline not-a-knot *que interpola los puntos de la tabla*

0	2	3	5	6	8	9	11	12	14	15
10	10	10	10	10	10	10.5	15	50	60	85

.

Dibuja su gráfica y comprueba que todos los valores que toma en el intervalo $[0, 15]$ son positivos.

Calcula el área de la región limitada por la gráfica del interpolante, el eje OX y las rectas $x = 0$ y $x = 15$.

Es interesante mencionar que, para el cálculo de integrales dobles y triples, MATLAB® dispone de las órdenes `integral2` e `integral3`, respectivamente.

Proyecto 1.4 (solución en página 20)

Utilizando la orden de MATLAB® `integral2`, calcula el volumen de una esfera de radio uno. Calcúlala también utilizando la orden `integral3`.

[8]Es decir, integrales con intervalos infinitos.

[9]Es decir, integrales con intervalos finitos, pero con integrandos no acotados en uno o varios puntos del intervalo de integración. Estos puntos son conocidos como «singularidades». La orden `integral` permite su cálculo, siempre que la singularidad no sea muy complicada y se sitúe en la frontera del intervalo de integración.

2. Derivación numérica

2.1. Fórmulas de diferencias

Al igual que en el diseño de las reglas elementales de cuadratura, los polinomios de interpolación pueden emplearse para generar fórmulas que permitan aproximar numéricamente el valor de la derivada de cierta función en un punto x fijado de antemano.

Consideremos una función

$$f : [a, b] \to \mathbb{R},$$

un punto $x_0 \in (a, b)$ y cierta colección de nodos equiespaciados del intervalo $[a, b]$. Asimismo, sea p el polinomio de interpolación asociado a f y a esos nodos.

La aproximación de la derivada primera de $f \in C^1[a, b]$ en x_0 se obtiene mediante la fórmula de diferencias (o de derivación numérica)

$$f'(x_0) \approx p'(x_0).$$

Si se trata de aproximar la derivada segunda de $f \in C^2[a, b]$ en x_0, la correspondiente fórmula de diferencias sería

$$f''(x_0) \approx p''(x_0).$$

De forma análoga se procedería con las derivadas tercera, cuarta, etc.

Mostramos a continuación las fórmulas de diferencias más básicas para el cálculo de las derivadas primera y segunda de una función f en un punto x_0.

Fórmula de la diferencia progresiva para la derivada primera:

Sean los nodos $x_0, x_0 + h$. El polinomio de interpolación asociado a f y a esos nodos es la línea recta de ecuación

$$y = f(x_0) + \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h}(x - x_0),$$

de donde se obtiene la fórmula de la diferencia progresiva para la derivada primera:

$$f'(x_0) \approx \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h}.$$

Fórmula de la diferencia centrada para la derivada primera:

Sean los nodos $x_0 - h, x_0 + h$. El polinomio de interpolación asociado a f y a esos nodos es la línea recta de ecuación

$$y = f(x_0 - h) + \frac{f(x_0 + h) - f(x_0 - h)}{2h}(x - x_0 + h),$$

de donde se obtiene la fórmula de la diferencia centrada para la derivada primera:

$$f'(x_0) \approx \frac{f(x_0 + h) - f(x_0 - h)}{2h}.$$

Fórmula de la diferencia centrada para la derivada segunda:

Sean los nodos $x_0 - h, x_0, x_0 + h$. Calculando el polinomio de interpolación asociado a f y a esos nodos, puede deducirse fácilmente la fórmula de la diferencia centrada para la derivada segunda:

$$f''(x_0) \approx \frac{f(x_0 + h) - 2f(x_0) + f(x_0 - h)}{h^2}.$$

Proyecto 2.1 (solución en página 23)

Considera de nuevo el spline not-a-knot *dado en el ejercicio 1.3.*

1. *Dibuja la recta tangente a la gráfica del* spline *en el punto* $x_0 = 12.6$.
2. *Calcula la longitud de la gráfica del* spline *en el intervalo* $[0, 15]$ [a].

[a] Recuerda que la longitud de la gráfica de una función f, para $x \in [a, b]$, viene dada por

$$\int_a^b \sqrt{1 + f'(x)^2}\, dx.$$

En las tres fórmulas de diferencias mencionadas, el error cometido tiende a cero cuando h tiene a cero. Sin embargo, la evolución del error es engañosa cuando estas expresiones se implementan en un ordenador. Basta observar los numeradores para darse cuenta del riesgo alto de cancelación numérica cuando se manejan valores de h cercanos a cero.

El problema que subyace en el fondo no es otro que el mal condicionamiento del problema del cálculo numérico de derivadas. Sea cual sea la fórmula de diferencias que se elija, la aparición de inestabilidad numérica (en forma de cancelación numérica) es inevitable cuando h decrece.

Las observaciones previas explican el fenómeno numérico denominado «dilema del incremento». Este fenómeno consiste en que, en la práctica, al utilizar en un ordenador las fórmulas de derivación numérica, aunque inicialmente el error decrece, a partir de cierto valor crítico el error empieza a aumentar.

Problema 2.1

Al aplicar una fórmula de diferencias no se deben tomar valores de h demasiado pequeños. Cuanto más pequeño es h, más probabilidad existe de que se produzca cancelación numérica. Por este motivo, en este tipo de fórmulas hay que seleccionar un valor de h que sea suficientemente pequeño para que el error sea también pequeño, pero suficientemente grande para que la cancelación numérica apenas aparezca. Este valor óptimo de h es diferente para cada fórmula de derivación numérica.

Considera la función

$$f(x) = xe^x$$

y el punto $x_0 = 1.9$.

Calcula $f'(x_0)$ mediante las fórmulas de las diferencias progresiva y centrada, tomando en ambos casos distintos valores de h tendiendo a cero. Por ejemplo, toma $h = 10^{-1}, 10^{-2}, \ldots, 10^{-15}$. *Calcula los errores cometidos y deduce en cada caso el valor crítico de h para el dilema del incremento. Compara los resultados obtenidos.*

Para cada fórmula de diferencias utilizada, haz una representación gráfica del error frente a h.

3. Soluciones de los proyectos

Proyecto 1.1

El siguiente código de MATLAB® realiza los cálculos solicitados.

Editor ▶ Pesos de cuadratura de la regla de Simpson 3/8 proyecto11.m

```
format rat
w1=zeros(10,1);
w2=zeros(10,1);
w3=zeros(10,1);
w4=zeros(10,1);
for n=1:10
    a=rand(1);
    b=a+rand(1);
    x1=a;
    x2=(2*a+b)/3;
    x3=(a+2*b)/3;
    x4=b;
    L1=@(x)((x-x2).*(x-x3).*(x-x4))/((x1-x2).*(x1-x3).*(x1-x4));
    L2=@(x)((x-x1).*(x-x3).*(x-x4))/((x2-x1).*(x2-x3).*(x2-x4));
    L3=@(x)((x-x1).*(x-x2).*(x-x4))/((x3-x1).*(x3-x2).*(x3-x4));
    L4=@(x)((x-x1).*(x-x2).*(x-x3))/((x4-x1).*(x4-x2).*(x4-x3));
    w1(n)=(1/(b-a))*integral(L1,a,b);
    w2(n)=(1/(b-a))*integral(L2,a,b);
    w3(n)=(1/(b-a))*integral(L3,a,b);
    w4(n)=(1/(b-a))*integral(L4,a,b);
end
disp([w1 w2 w3 w4])
```

Su ejecución en MATLAB® genera el resultado esperado:

Command Window

```
>> proyecto11
       1/8            3/8            3/8            1/8
       1/8            3/8            3/8            1/8
       1/8            3/8            3/8            1/8
       1/8            3/8            3/8            1/8
       1/8            3/8            3/8            1/8
       1/8            3/8            3/8            1/8
       1/8            3/8            3/8            1/8
       1/8            3/8            3/8            1/8
       1/8            3/8            3/8            1/8
       1/8            3/8            3/8            1/8
```

Proyecto 1.2

El siguiente código de MATLAB® muestra, para las dos integrales del enunciado, la evolución del error cometido por la regla de Simpson compuesta al dividir el intervalo original en un número creciente de subintervalos. Observa que se utiliza el código del proyecto 1.3, que implementa la regla de Simpson compuesta.

Editor ▶ Órdenes de convergencia proyecto12.m

```
disp(' ')
disp('Tabla 1: Resultados para la función g1(x)=x*cos(x)')
disp(' ')

g1=@(x)x.*cos(x);
e1=@(x)x.*sin(x)+cos(x);
n=10;
for i=1:4
    S=simpcomp(g1,0,15,n);
    err=abs(e1(15)-e1(0)-S);
    h=15/n;
    fprintf('n=%5d   h=%.1e   error=%.4e \n',10^i,h,err)
    n=10*n;
end

disp(' ')
disp('Tabla2: Resultados para la función g2(x)=sqrt(x)')
disp(' ')

g2=@(x)sqrt(x);
e2=@(x)2/3*x^(3/2);
n=10;
for i=1:4
    S=simpcomp(g2,0,15,n);
    err=abs(e2(15)-e2(0)-S);
    h=15/n;
    fprintf('n=%5d   h=%.1e   error=%.4e \n',10^i,h,err)
    n=10*n;
end

function S=simpcomp(f,a,b,n)
h=(b-a)/(2*n);
x=a:h:b;
c=ones(1,2*n+1);
c(2:2:2*n)=4;
c(3:2:2*n-1)=2;
S=(h/3)*c*f(x)';
end
```

Al ejecutar este código en MATLAB® se obtiene:

Command Window
```
>> proyecto12

Tabla 1: Resultados para la función g1(x)=x*cos(x)

n=   10   h=1.5e+00   error=2.8774e-02
n=  100   h=1.5e-01   error=2.6448e-06
n= 1000   h=1.5e-02   error=2.6426e-10
n=10000   h=1.5e-03   error=3.1974e-14

Tabla2: Resultados para la función g2(x)=sqrt(x)

n=   10   h=1.5e+00   error=5.2730e-02
n=  100   h=1.5e-01   error=1.6675e-03
n= 1000   h=1.5e-02   error=5.2731e-05
n=10000   h=1.5e-03   error=1.6675e-06
```

Los resultados de la tabla 1 son los esperados, puesto que la función que se ha integrado, $g_1(x) = x\cos(x)$, tiene suficiente regularidad para que la evolución del error sea de orden 4, tal como predice la teoría. En efecto, cuando el paso se divide por 10 (o, dicho de otra forma, cuando el número de subintervalos se multiplica por 10), puedes observar que el error se divide por 10^4. El error verifica, por tanto, $E_{g_1}(h) = \mathcal{O}(h^4)$, cuando h tiende a cero.

La tabla 2 muestra la evolución del error para la función $g_2(x) = \sqrt{x}$. En esta ocasión los resultados no son los esperados.

Dividamos el penúltimo error por el último:

Command Window
```
>> 5.2731e-05/1.6675e-06

ans =

   31.6228
```

Observa ahora el valor aproximado de $10^{1.5}$:

Command Window
```
>> 10^(1.5)

ans =

   31.6228
```

Ambos resultados son idénticos (en formato corto). En consecuencia, cuando el paso se divide por 10 el error se divide por $10^{1.5}$, luego la evolución del error es de orden 1.5. El error verifica, por tanto, $E_{g_2}(h) = \mathcal{O}(h^{1.5})$, cuando h tiende a cero.

La explicación de esta situación inesperada es que g_2 no tiene suficiente regularidad. Observa que ni siquiera su derivada primera está acotada en $(0, 15]$, pues

$$g_2'(x) = \frac{1}{2\sqrt{x}}.$$

Proyecto 1.3

La siguiente función de MATLAB® implementa la regla de Simpson compuesta.

Editor ▶ Regla de Simpson compuesta simpcomp.m

```
function S=simpcomp(f,a,b,n)
h=(b-a)/(2*n);
x=a:h:b;
c=ones(1,2*n+1);
c(2:2:2*n)=4;
c(3:2:2*n-1)=2;
S=(h/3)*c*f(x)';
end
```

Vamos a aplicar la regla de Simpson compuesta para aproximar el valor de la integral

$$\int_0^1 \frac{dx}{\sqrt{1+x^4}}.$$

con nueve cifras significativas correctas.

Podemos aproximar el valor de la integral anterior con todo el nivel de precisión que queramos (con el límite impuesto por la precisión de la máquina) sin más que aplicar la regla de Simpson compuesta para un número suficientemente grande de subintervalos.

En el siguiente código se aplica la regla de Simpson compuesta sucesivamente desde 2 hasta 30 subintervalos.

Editor ▶ Aproximación con la regla de Simpson compuesta proyecto13.m

```
f=@(x)1./sqrt(1+x.^4);
for n=2:30
    S=simpcomp(f,0,1,n);
    fprintf('n=%2d   S=%17.15f \n',n,S);
end
```

La tabla de salida muestra las diferentes aproximaciones obtenidas:

Command Window

```
>> proyecto13
n= 2   S=0.927158686992247
n= 3   S=0.927055827425538
n= 4   S=0.927043239682400
n= 5   S=0.927039735957012
n= 6   S=0.927038489045902
n= 7   S=0.927037957689698
n= 8   S=0.927037700778739
n= 9   S=0.927037564405099
```

```
n=10   S=0.927037486616896
n=11   S=0.927037439636844
n=12   S=0.927037409912314
n=13   S=0.927037390365002
n=14   S=0.927037377084704
n=15   S=0.927037367807269
n=16   S=0.927037361168087
n=17   S=0.927037356315809
n=18   S=0.927037352703080
n=19   S=0.927037349968563
n=20   S=0.927037347868062
n=21   S=0.927037346233061
n=22   S=0.927037344945064
n=23   S=0.927037343919323
n=24   S=0.927037343094285
n=25   S=0.927037342424613
n=26   S=0.927037341876481
n=27   S=0.927037341424353
n=28   S=0.927037341048738
n=29   S=0.927037340734611
n=30   S=0.927037340470278
```

¿Cómo podemos detectar que la aproximación de la integral ha alcanzado nueve cifras significativas correctas?

El criterio utilizado consiste en observar la evolución de los resultados y detener los cálculos cuando dos aproximaciones consecutivas compartan los nueve primeros dígitos. Esto ocurre para $n = 29$ y $n = 30$, respectivamente, de forma que la estimación

$$\int_0^1 \frac{dx}{\sqrt{1+x^4}} \approx 0.927037340$$

tiene nueve cifras significativas correctas.

Proyecto 1.4

1. En primer lugar, vamos a calcular el volumen de una esfera de radio uno mediante la orden de MATLAB® `integral2`.

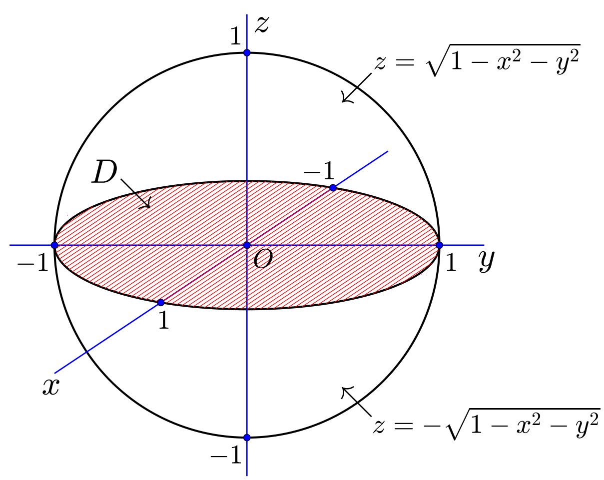
   En concreto, calcularemos el volumen de la esfera de radio uno centrada en el origen de coordenadas. La ecuación de esta esfera es

   $$x^2 + y^2 + z^2 = 1.$$

   Al despejar la variable z se obtienen las ecuaciones de los hemisferios norte y sur de la esfera,

   $$z = \pm\sqrt{1 - x^2 - y^2},$$

   donde el signo positivo corresponde al hemisferio norte y el signo negativo, al hemisferio sur. Las variables (x, y) varían en la región del plano limitada por el ecuador de la esfera (es decir, el círculo de centro el origen y radio uno), esto es, $(x, y) \in D : x^2 + y^2 \leqslant 1$.

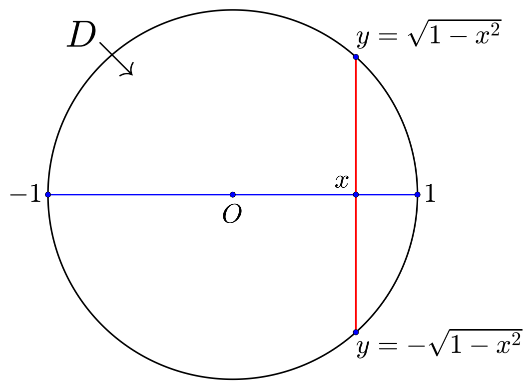


   El volumen V de la esfera coincide con el doble del volumen de cualquiera de sus dos hemisferios, luego

   $$V = 2\iint_D \sqrt{1 - x^2 - y^2}\, dxdy.$$

   Calculamos esta integral doble mediante el teorema de Fubini. Para ello, definimos los siguientes límites de integración, que describen la región D:

   - $-1 \leqslant x \leqslant 1$,
   - $-\sqrt{1 - x^2} \leqslant y \leqslant \sqrt{1 - x^2}$.



Realizamos el cálculo en MATLAB®:

Command Window

```
>> format long
>> f=@(x,y)sqrt(1-x.^2-y.^2);
>> yinf=@(x)-sqrt(1-x.^2);
>> ysup=@(x)sqrt(1-x.^2);
>> V=2*integral2(f,-1,1,yinf,ysup)

V =

   4.188790204785020
```

Comprobamos que el cálculo es correcto comparando con $\frac{4\pi}{3}$, el valor exacto del volumen de una esfera de radio uno:

Command Window

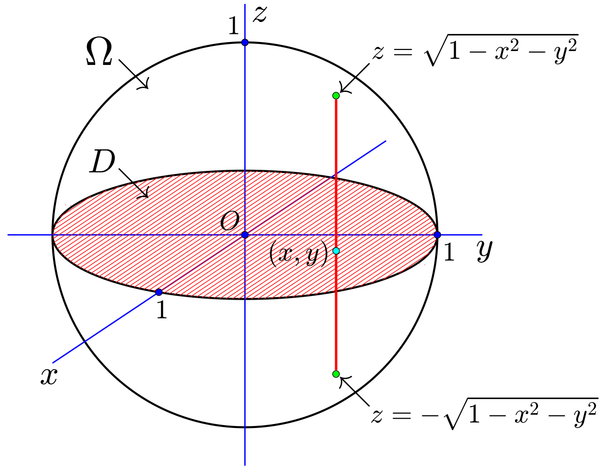
```
>> 4*pi/3

ans =

   4.188790204786391
```

2. Vamos a calcular de nuevo el volumen de una esfera de radio uno, pero en esta ocasión haciendo uso de la orden de MATLAB® integral3.

   El volumen de la esfera centrada en el origen y radio uno viene dado por la integral triple

$$V=\iiint_{\Omega} dxdydz,$$

   donde $\Omega : x^2+y^2+z^2 \leqslant 1$.



Calculamos esta integral triple mediante el teorema de Fubini. Para ello, definimos los siguientes límites de integración, que describen la región Ω:

- $-1 \leqslant x \leqslant 1$,
- $-\sqrt{1-x^2} \leqslant y \leqslant \sqrt{1-x^2}$,
- $-\sqrt{1-x^2-y^2} \leqslant z \leqslant \sqrt{1-x^2-y^2}$.

Realizamos el cálculo en MATLAB®:

Command Window

```
>> format long
>> f=@(x,y,z)x.^0;
>> yinf=@(x)-sqrt(1-x.^2);
>> ysup=@(x)sqrt(1-x.^2);
>> zinf=@(x,y)-sqrt(1-x.^2-y.^2);
>> zsup=@(x,y)sqrt(1-x.^2-y.^2);
>> V=integral3(f,-1,1,yinf,ysup,zinf,zsup)

V =

   4.188790204786391
```

Por último, observa que, para evitar errores en MATLAB®, hemos escrito el integrando, es decir, la función idénticamente uno, en la forma $f(x, y, z) = x^0$.

Proyecto 2.1

El siguiente código de MATLAB® realiza el cálculo de la longitud de la gráfica del *spline* en el intervalo $[0, 15]$ y genera una imagen en la que se muestra la recta tangente a la gráfica del *spline* en el punto $x_0 = 12.6$.

Editor ▶ Recta tangente y longitud proyecto21.m

```
format long g

x=[0 2 3 5 6 8 9 11 12 14 15];
y=[10 10 10 10 10 10 10.5 15 50 60 85];

f=@(z)spline(x,y,z);

% Apartado 1

d=@(x,h)(f(x+h)-f(x-h))/(2*h);

r=@(x,h,x0)f(x0)+d(x0,h).*(x-x0);

s=0:0.01:15;

figure
plot(s,f(s),'b',s,r(s,10^(-5),12.6),'r',12.6,f(12.6),'ok',...
    'LineWidth',1.5,...
    'MarkerEdgeColor','k',...
    'MarkerFaceColor','g',...
    'MarkerSize',8),shg

% Apartado 2

g=@(x,h)sqrt(1+d(x,h).^2);

Longitud=integral(@(x)g(x,10^(-5)),0,15);
disp('Longitud')
disp(Longitud)
```

Observa que hemos definido el *spline* como una función anónima de MATLAB® de variable independiente z:

$$f(z) := \mathrm{spline}(x, y, z)$$

Fíjate también en que la ecuación de la recta tangente r calculada en el código anterior es

$$y = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0),$$

pues pasa por el punto $(x_0, f(x_0))$ y su pendiente vale $f'(x_0)$.

Por último, es importante notar que al introducir el integrando g en la orden `integral` de MATLAB® es necesario especificar cuál de las dos variables de las que depende g, esto es, x y h, es la variable de integración.

Ejecutamos el código en MATLAB®:

Command Window

```
>> proyecto21
Longitud
         99.4564559907307
```